На правах рукописи

Ухов Александр Ильич

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ НА ТЕЧЕНИЕ И ТЕПЛООБМЕН РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА

Специальность 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Екатеринбург - 2010

Работа выполнена на кафедре технической физики Уральского Федерального Университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина и в отделе теплофизики и поверхностных явлений НИИ Физики и прикладной математики УрГУ г. Екатеринбург.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор Породнов Борис Трифонович
Научный консультант:	доктор физико-математических наук, профессор Борисов Сергей Федорович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Иванов Алексей Олегович
	кандидат физико-математических наук старший научный сотрудник Поддубный Василий Алексеевич
Ведущая организация:	Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург

Защита состоится “3” декабря 2010 г. в 15^{00} часов на заседании диссертационного совета Д 212.285.02 при Уральском федеральном университете имени первого Президента России Б.Н. Ельцина в аудитории I главного учебного корпуса (зал ученого совета) по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19.

С диссертацией можно ознакомиться в читальном зале библиотеки Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина.

Ваш отзыв в одном экземпляре, заверенный гербовой печатью, просим направлять по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Ученому секретарю университета.

Автореферат разослан “2” ноября 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета Д 212.285.02, д.ф.-м.н., профессор Г.И. Пилипенко

Общая характеристика работы

Актуальность проблемы

Интерес к исследованию переноса энергии и импульса на межфазной границе газ-твердое тело обусловлен многими причинами, среди которых, прежде всего, потребности практики. В частности, расчет вакуумных систем, обеспечение режима теплообмена летательных аппаратов, а также расчет газодинамического сопротивления при внешнем и внутреннем обтеканиях различных объектов требуют учета параметров, характеризующих структуру и химический состав поверхности. Важной характеристикой поля течения является степень разреженности газового потока, которая характеризуется числом Кнудсена (*Kn*) и определяется отношением средней длины свободного пробега молекул к характерному параметру задачи. В качестве последнего, например, может быть рассмотрен линейный размер поперечного сечения канала, по которому течет разреженный газ, или диаметр проволочного металлического зонда, обменивающегося теплом с окружающим его газом. При увеличении степени разреженности газа роль межфазного взаимодействия и эффективность переноса энергии и импульса значительно возрастает, так как при увеличении числа Кнудсена межмолекулярные столкновения становятся несущественными по сравнению со столкновениями молекул с поверхностью, и в предельном случае так называемого свободномолекулярного режима течения или теплообмена ($Kn \to \infty$) эффективность переноса энергии и импульса в системе газ–твердое тело полностью определяется процессами, происходящими на поверхности.

Физическая неоднородность поверхности, или, как принято говорить, ее шероховатость представляет собой один из наиболее существенных факторов, которые необходимо принимать во внимание. Шероховатость поверхности оказывает существенное влияние на такие макропараметры системы как: коэффициенты аккомодации импульса и энергии, вероятность рассеяния молекул поверхностью, коэффициент конденсации. Интерес к исследованию влияния шероховатости на поток возник еще во второй половине прошлого века. До недавнего времени из-за недостатка информации о структуре поверхности и ее роли при взаимодействии газа с твердым телом рассматривались подходы с использованием абсолютно гладких поверхностей или простейших моделей шероховатости, каждая из которых воспроизводила структуру конкретных поверхностей путем задания формы элементов микроструктуры. В свою очередь в работе [1] было показано, что использование простейших моделей шероховатости или поверхности, по своей структуре очень близкой к реальной (восстановленной при помощи данных атомно-силовой микроскопии) поверхности, может оказывать существенное влияние на поток по сравнению с реальными каналами даже для относительно коротких каналов.

Проблема учета взаимодействия молекул с поверхностью при течении и теплообмене разреженного газа становится особенно актуальной в связи с разработкой газоуправляемых микросистем (принятая в зарубежной литературе аббревиатура GASMEMS) и кнудсеновских компрессоров [2]. Дело в том, что при уменьшении габаритов устройств параметры, характеризующие режим течения и теплообмена газа, также уменьшаются. При этом режим больших чисел Кнудсена достигается уже при сравнительно более высоких давлениях газа, когда адсорбционные процессы играют существенную роль.

Эффект влияния химического состава на поток разреженного газа в каналах и на теплообмен на границе газ-твердое тело был косвенно обнаружен еще в работах Кнудсена [3] и Клаузинга [4]. Эксперименты показывают, что поверхностная структура, степень ее физической и химической неоднородности оказывают существенное влияние на процессы переноса тепла и массы вблизи поверхности. До недавнего времени оценка количественной стороны этого влияния представляла значительную проблему. В обзорах, содержащих экспериментальные значения эффективности теплообмена между разреженным газом и твердым телом, можно видеть обширное поле невоспроизводимых результатов [5, 6]. Так,

например, величина коэффициента аккомодации энергии (КАЭ) для случая теплового рассеяния *He* на *W* при схожих условиях по температуре газа и поверхности у различных авторов отличаются на два порядка, что говорит о существенном влиянии состояния поверхности в таких экспериментах. Становится очевидным, что изучение эффектов, возникающих при взаимодействии газа с твердым телом, приобретает исключительно важное значение. Однако, по-прежнему, экспериментальные исследования в условиях контроля поверхности остаются немногочисленными. К сожалению, существующие теоретические модели теплообмена [7] не дают возможности воспользоваться ими для адекватного описания полученных экспериментальных зависимостей, поскольку не рассматривают влияние адсорбционного покрытия поверхности на процесс рассеяния газа поверхностью. Иногда возникают случаи, когда многочисленные модели граничных условий «конфликтуют» между собой, требуя эмпирической подгонки под реальные условия эксперимента. С другой стороны, как было показано выше, имеющиеся экспериментальные данные могут даже противоречить друг другу.

Обращение к этой проблеме в настоящее время в значительной степени стимулировано развитием техники диагностики поверхности. В частности, благодаря оже-электронной спектроскопии и атомно-силовой микроскопии значительно расширились возможности получения данных о структуре и химическом составе поверхности и их влиянии на процессы тепломассопереноса. В свою очередь, развитие методов компьютерного моделирования позволяет достичь некоторого прогресса в численном моделировании взаимодействия на атомно-молекулярном уровне газа с твердым телом, с учетом реальной структуры поверхности и межатомных потенциалов, а также в описании течения разреженного газа в каналах, структура поверхности и химический состав которых соответствует условиям физического эксперимента.

Вышесказанное подтверждает актуальность данной работы, ориентированной на исследование влияния химического состава и структуры поверхности на течение и теплообмен разреженного газа.

Диссертационная работа выполнялась в рамках проекта 2.2.2.2/5579 аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)” и поддерживалась американским фондом CRDF (грант REC RUXO-005-EK-06/ BG4M05).

Цель работы и задачи исследования

Целью данной работы было исследование влияния химического состава и структуры поверхности на течение и теплообмен разреженного газа. В соответствии с этим были поставлены следующие основные задачи:

1. при помощи метода Монте-Карло исследовать рассеяние монохроматического молекулярного пучка шероховатой поверхностью, структура которой восстановлена по данным атомно-силовой микроскопии;
2. разработать методику компьютерного моделирования шероховатых структур, включая возможность моделирования структур, наблюдаемых в ходе атомно-силовой микроскопии;
3. методом пробной частицы оценить влияние различных структур шероховатости (смоделированных при помощи разработанной методики) цилиндрического канала на вероятность его прохождения;
4. методом пробной частицы оценить влияние величины относительной микрошероховатости структуры (восстановленной согласно данным атомно-силовой микроскопии) внутренней стенки цилиндрического канала на свободномолекулярное течение газа;
5. разработать компьютерную модель, описывающую в терминах коэффициента аккомодации энергии тепловое равновесное и неравновесное рассеяние атома газа на

кристаллической структуре твердого тела с заданной долей заполнения монослоя адсорбированными атомами;
6. с помощью разработанной модели описать влияние химического состава поверхности на свободномолекулярное течение газа в гладком цилиндрическом канале.

Научная новизна

В диссертационной работе предложены следующие разработанные методы:

1. метод исследования шероховатых поверхностей, полученных в ходе атомно-силовой микроскопии образцов *SiC* и используемых в газодинамических экспериментах, а также метод моделирования шероховатых структур с использованием статистических процедур, различных сплайнов для задания формы отдельного пика шероховатости; возможности метода в целом позволяют моделировать структуры, функции распределения неровностей по высоте которых близки к соответствующим функциям реальных структур;
2. метод реконструирования шероховатых поверхностей и внутренних стенок каналов на основе данных атомно-силовой микроскопии для дальнейшего определения влияния структуры и величины относительной шероховатости на механизм рассеяния и на вероятность прохождения канала разреженным потоком газа;
3. метод нахождения аналитического вида функций распределения рассеянных на поверхности частиц;
4. метод моделирования теплового равновесного и неравновесного рассеяния атома газа на кристаллической решетке твердого тела, описывающий в терминах коэффициента аккомодации энергии (КАЭ) реальный эксперимент по рассеянию атома гелия на кристаллической решетке вольфрама с учетом адсорбционного покрытия;
5. метод моделирования, описывающий в терминах вероятности прохождения реальный эксперимент по исследованию влияния химического состава внутренней поверхности цилиндрического канала на свободномолекулярное течение.

В результате проведенной работы впервые:

1. при помощи разработанного подхода исследовано влияние средней высоты микроструктуры (реконструированной на основе данных атомно-силовой микроскопии) на рассеяние монохроматического молекулярного пучка при абсолютно зеркальном отражении (ε=0) и полностью диффузном рассеянии (ε=1) частиц на элементе поверхности. Обнаружено, что увеличение средней высоты шероховатости является одним из существенных факторов, оказывающих сопротивление потоку особенно при зеркальном отражении молекул от поверхности;
2. получены данные о распределении числа столкновений частиц с поверхностью в зависимости от высоты шероховатости для зеркальной и диффузной схемы взаимодействия: установлено, что при диффузном рассеянии число многократных столкновений частиц с поверхностью увеличивается прямопропорционально высоте шероховатости в отличие от зеркального отражения, где высота неровности практически не оказывает влияние на число столкновений частиц при данном угле падения пучка на поверхность;
3. продемонстрирована разработанная автором методика моделирования шероховатых структур, а также цилиндрических каналов, построенных на их основе с использованием статистических методов и данных атомно-силовой микроскопии; также показана работоспособность методики, обеспечивающей построение шероховатой поверхности, функция распределения которой практически совпадает с функцией распределения по высоте элементов шероховатости реальной поверхности, получаемой с использованием атомно-силовой микроскопии;

4. показано, что шероховатость поверхности оказывает значительное влияние на газодинамическую проводимость канала, а именно установлено, что средняя высота микронеровности и функция распределения элементов шероховатости по высоте не являются единственными факторами, которые влияют на вероятность прохождения молекул газа через цилиндрический канал. Кроме того, обнаружено, что результаты, полученные для искусственных случаев (гладкая, “статистическая”, “вырожденная” структура канала), существенно отличаются от случая со структурой, восстановленной согласно данным атомно-силовой микроскопии;
5. обнаружено, что при размерах средней высоты шероховатости на порядок меньшей радиуса канала, вероятность его прохождения меньше примерно на 15-20% по сравнению с каналом с идеально-гладкими стенками. Причём, эта разница увеличивается при дальнейшем увеличении величины средней шероховатости;
6. продемонстрирована эффективность разработанной автором модели получения равновесных и неравновесных коэффициентов аккомодации энергии атомов газа при рассеянии на поверхности кристаллической решетки. Сравнение расчетных зависимостей с данными, полученными в экспериментах с контролируемой поверхностью, показывает, что с помощью разработанного подхода может быть достигнуто удовлетворительное описание экспериментальных температурных зависимостей равновесного КАЭ гелия для чистой поверхности вольфрама, а также неравновесного КАЭ для поверхности, частично заполненной адсорбатом;
7. при помощи разработанной автором модели получена вероятность прохождения цилиндрического канала (внутренняя стенка которого представляет собой напыление атомов титана с адсорбированными атомами кислорода) атомами *He*, *Ar*, *Kr*. Полученные данные находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом.

Практическая ценность работы

1. Разработанный автором метод моделирования рассеяния молекулярных пучков позволяет получать информацию о влиянии высоты микрошероховатости на процесс рассеяния атомов структурой. Другим положительным моментом данной методики является возможность получения аналитического вида функции распределения частиц, отраженных от шероховатой поверхности. Данная функция распределения может быть использована при задании граничных условий для газодинамического описания полей течения около поверхности, имеющей заданный уровень шероховатости.
2. Использование разработанного метода моделирования шероховатых поверхностей приближает создаваемые структуры к тем, которые получаются при исследовании с помощью атомно-силовой микроскопии реальных образцов материалов. Учитывая возможности подхода в плане моделирования практически любых поверхностных структур, он может оказаться эффективным при прогнозировании свойств разрабатываемых объектов микрофлюидики, в которых процессы взаимодействия молекул газов с поверхностью имеют существенное значение.
3. Полученные в работе результаты, описывающие влияние структуры поверхности на поток, могут иметь самостоятельное значение для вакуумной техники и могут быть использованы при расчетах трубопроводов и других элементов вакуумных приборов и оборудования. Особенно актуально для практики в настоящее время изучение течений газов в очень узких каналах и щелях в связи с широким распространением микроэлектромеханических систем и различных фильтрующих устройств, используемых в нанотехнологиях. Кроме того, полученные данные о вероятности прохождения цилиндрических каналов могут быть использованы в качестве справочных данных.
4. Разработанные автором модель теплового рассеяния атомов газа на кристаллической решетке с учетом адсорбционного покрытия, реализуемого в равновесных и неравновесных условиях, и модель, описывающая течение разреженного газа в

микроканале с учетом его химического состава, могут быть использованы при исследовании процессов, происходящих на границе раздела газ-твердое тело. С помощью указанных моделей, например, становится возможным делать прогноз о величине тепловых и массовых потоков газа в микроканалах, что, в первую очередь, диктуется потребностями практики. Данная работа также имеет фундаментальное значение связаннное с развитием модельных представлений о процессах тепломассопереноса в системе газ-твердое тело.

Автор защищает:

1. Разработанные им лично и в сотрудничестве с другими авторами метод моделирования шероховатых структур, метод реконструирования шероховатых поверхностей и внутренних стенок каналов на основе данных атомно-силовой микроскопии, метод нахождения аналитического вида функций распределения рассеянных на поверхности частиц, метод моделирования теплового равновесного и неравновесного рассеяния атома газа на кристаллической решетке твердого тела с учетом его адсорбционного покрытия, метод моделирования течения разреженного газа в гладком цилиндрическим канале с учетом химического состава его внутренней поверхности;
2. Результаты исследования влияния структуры на рассеяние молекулярного пучка;
3. Результаты, описывающие влияние микроструктуры и величины относительной микронеровности стенок цилиндрического канала на вероятность его прохождения разреженным газом.

Достоверность полученных результатов обеспечивается:

Использованием современных представлений о взаимодействии газ-твердое тело; применением многократного тестирования на задачах, имеющих классическое и теоретическое решение; согласием полученных результатов с наиболее надежными теоретическими и экспериментальными данными; тщательным анализом и корректной оценкой получаемых результатов; воспроизводимостью полученных результатов;

Апробация работы

Результаты, приведенные в диссертации, докладывались и обсуждались на следующих международных и национальных конференциях:

1. I Всероссийская конференция «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» (ММПСН–2008), 12–14 марта 2008, г. Москва;
2. XII Международная научная конференция «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул и в лазерных, плазменных и нанотехнологиях» с 31 марта по 4 апреля 2008, г. Звенигород;
3. VII Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2008) 24-31 мая 2008, г. Алушта, Крым;
4. XVI Международная конференция по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2009) 25-31 мая 2009, г. Алушта, Крым;
5. Международная научно-практическая конференция «Снежинск и наука – 2009. Современные проблемы атомной науки и техники» 1 – 5 июня 2009, г. Снежинск;
6. 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD26) July 20-25 2009, Kyoto, Japan;

7. XIII Международная научная конференция «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул и в лазерных, плазменных и нанотехнологиях» 5 - 9 октября 2009, г. Звенигород;
8. 2nd GASMEMS Workshop – July 2010, Les Embiez, France;
9. 27th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (RGD27) July 10-15 2010, Pacific Grove, California, USA.

Публикации

Основные результаты исследования опубликованы в 13 научных работах, в том числе в 3 статьях в реферируемых российских и зарубежных периодических научных изданиях.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из Введения, 5 глав и списка цитируемой литературы. Результаты диссертации изложены на 105 страницах текста, содержат 44 рисунка, 8 таблиц. Список литературы включает 103 наименования.

Содержание работы

Во ***Введении*** обосновывается актуальность темы диссертационной работы, ее цель, отражены научная новизна и практическое значение результатов исследования, сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

В ***первой главе*** приведена вводная информация, включающая в себя некоторые теоретические и практические сведения, касающиеся процесса взаимодействия газа с поверхностью.

Во ***второй главе*** приведены результаты моделирования, описывающие влияние величины шероховатости на рассеяние моноэнергетического молекулярного пучка. Шероховатые структуры, используемые при моделировании, были реконструированы на основе данных, полученных при атомно-силовой микроскопии (АСМ) образца *SiC*. Данные атомно-силовой микроскопии были представлены Борисовым С.Ф.. В частности, при использовании АСМ получается трехмерная оцифрованная поверхность, представляющая собой массив $\{x_i, y_i, z_i\}$, элементы которого содержат координаты каждой точки поверхности исследуемого образца. Пример визуализированной с использованием данных АСМ шероховатой структуры поверхности представлен на рис. 1. На рис. 2 представлен профиль поверхности вдоль одного из направлений сканирования образца.

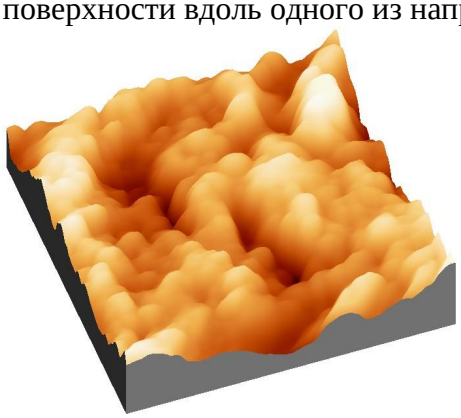


Рис. 1. Структура поверхности, полученная при атомно-силовой микроскопии образца *SiC* размером 20×20 мкм

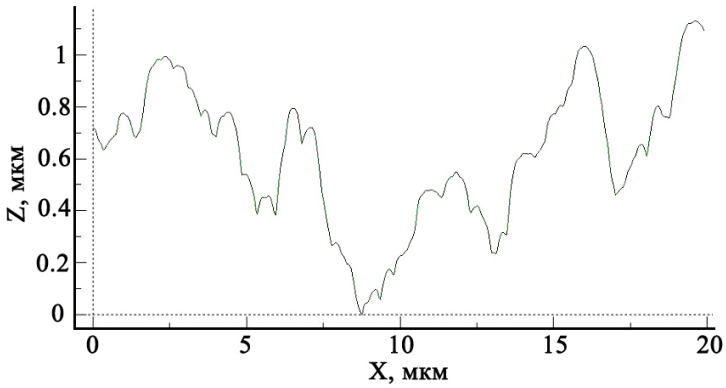


Рис. 2. Профиль поверхности вдоль одного из направлений сканирования образца *SiC*

В ходе исследования полученной поверхности был проведен анализ, в процессе которого были определены основные характеристики заданной структуры. Было установлено, что распределение неровности по высоте подчиняется нормальному закону (см. рис. 3). С помощью вариационного метода, подробно описанного в [8], была выполнена оценка фрактальной размерности поверхности D_f. Полученные параметры микроструктуры представлены в таблице 1.

Приводятся данные, полученные в ходе моделирования рассеяния моноэнергетического молекулярного пучка на структуре, которая восстановлена при помощи данных атомно-силовой микроскопии.

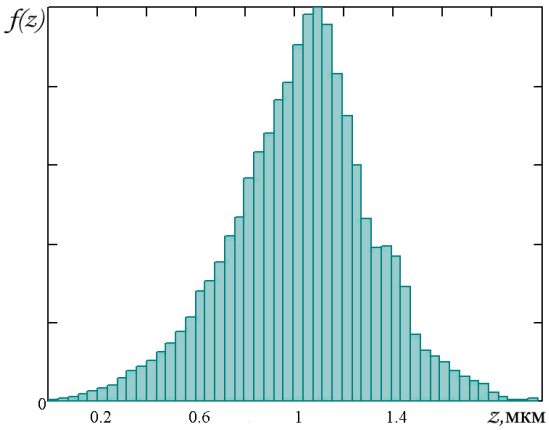


Рис. 3. Функция распределения по высоте исследуемого образца *SiC*

Таблица 1. Параметры микроструктуры поверхности

<Z>, мкм средняя высота шероховатости	σ, мкм величина микронеровности поверхности	D_f фрактальная размерность
1.106	0.275	2.46

Схематичное изображение моделируемой системы представлено на рис. 4. В начальный момент времени моделируется место старта частиц и компонент скорости в соответствии с заданным модулем скорости и углом падения пучка к исследуемой поверхности. Затем модельные частицы начинают свободное движение.

Для исследования влияния высоты шероховатости на рассеяние частиц при моделировании задействована возможность изменения высоты среднего уровня шероховатости путем изменения множителя высоты H=0 ÷ 5. При H=0 поверхность вырождается в плоскость, а при H=5 z-координата каждой точки поверхности увеличивается в 5 раз. Значению H = 1 соответствует поверхность, реконструируемая по данным атомно-силовой микроскопии экспериментально исследуемого образца (см. рис. 5).

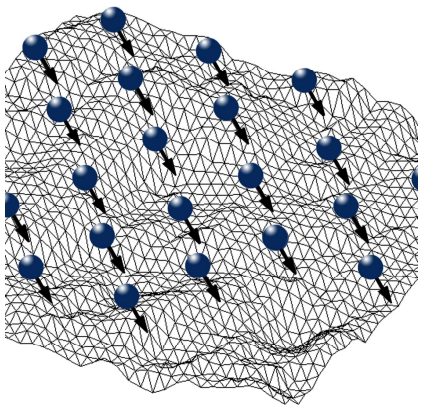
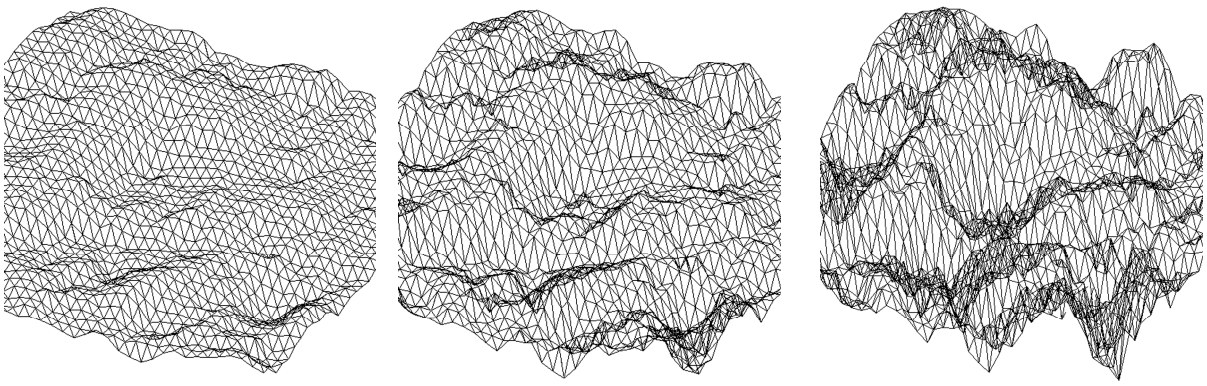


Рис. 4. Схематичное изображение модели взаимодействия атома с шероховатой поверхностью



а *б* *в*

Рис. 5. Образец поверхности при различных значениях множителя высоты: *а* - H=1, *б* – H=3, *в* – H=5

В ходе моделирования получены индикатрисы рассеяния монохроматического молекулярного пучка в зависимости от угла падения и средней высоты поверхностной микронеровности в плоскости падения пучка.

На первом этапе численного эксперимента рассматривалось полностью зеркальное отражение частиц пучка на элементе поверхности (ε = 0). Моделирование проводилось при H = 1, 2, 3, 4, 5 и углах падения θ_i = 75°, 45°, 15°, 0°. Результат моделирования представлен на рис. 6.

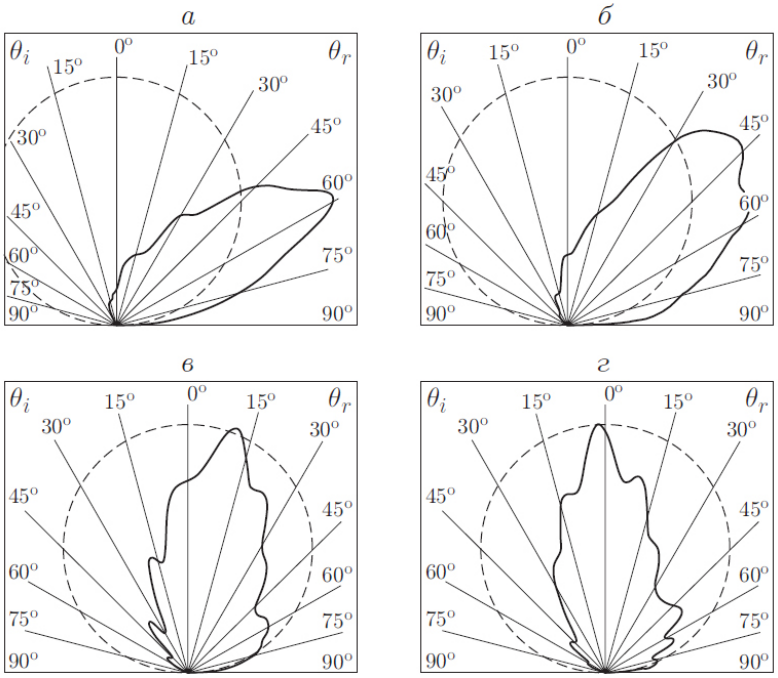


Рис. 6. Индикатрисы рассеяния отраженных (ε = 0) от поверхности частиц при H=1 и различных углах падения: *а* - θ_i = 75°, *б* - θ_i = 45°, *в* - θ_i = 15°, *г* - θ_i = 0°; штриховые линии – косинусоидальное распределение

Установлено, что при уменьшении угла падения θ_i происходит изменение наклона индикатрисы. Форма индикатрисы имеет лепестковый вид в отличие от δ-функции при рассеянии частиц на абсолютно-гладкой поверхности. Также установлено, что с увеличением множителя высоты от H=1 до H=5 наблюдается изменение формы индикатрис рассеяния от лепестковых (при H=1 и H=2) до косинусоидальных, характерных для диффузного рассеяния частиц при значении H больше двух. Таким образом, можно заключить, что естественная шероховатость (H=1) значительно влияет на рассеяние пучка при зеркальном отражении частиц и не соответствует δ-функции.

На втором этапе рассматривалось диффузное рассеяние (ε=1) молекулярного пучка при углах падения θ_i = 75°, 45°, 15°, 0° на поверхностях с множителем высоты H=1, 3, 5. На рис. 7 изображено распределение компоненты скорости υ_y, полученное при вышеуказанных углах падения и множителе высоты H=3. Пунктиром изображено максвелловское распределение υ_y - компоненты скорости. В нижней части рис. 7 изображены соответствующие индикатрисы и косинусоидальное распределение.

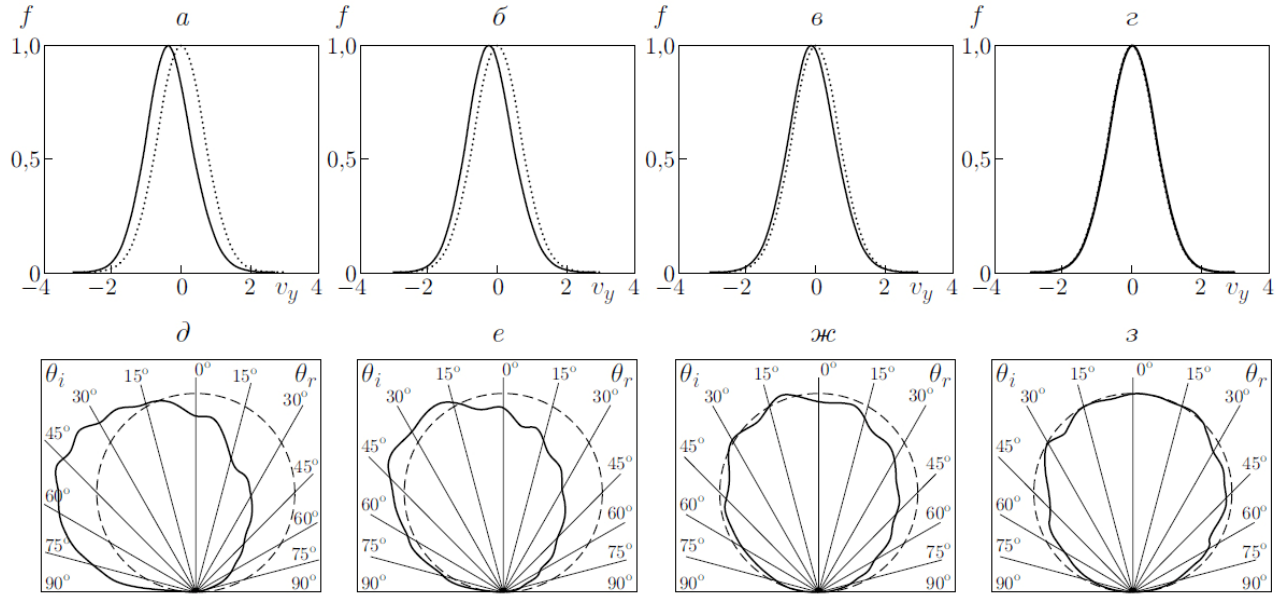


Рис. 7. Распределение компоненты скрости υ_y отраженных от поверхности частиц (ε = 1) (*а-г*) и соответствующие индикатрисы рассеяния (*д-з*) при *H*=3 и различных углах падения: *а, д* - θ_i=75°, *б, е* - θ_i=45°, *в, ж* - θ_i=15°, *г, з* - θ_i=0°; пунктирные линии – максвелловское распределение компоненты скорости; штриховые – косинусоидальное распределение

Установлено, что при уменьшении угла падения θ_i величина смещения полученного распределения компоненты υ_y от максвелловской кривой уменьшается, а при θ_i =0 обе функции совпадают. Соответственно заметно изменение формы индикатрисы от лепестковой к распределенной по закону косинуса. Величина смещения полученного распределения компоненты скорости υ_y относительно гауссовской кривой была при *H*=1 меньше, а при *H*=5 больше. То же можно сказать и про индикатрисы, наклон которых при *H*=1 меньше, а при *H*=5 больше. Таким образом, при углах падения пучка, больших 15°, можно наблюдать присутствие эффекта «обратного рассеяния» частиц на поверхности. Получено, что данное явление будет преобладать при дальнейшем увеличении величины средней микрошероховатости, а также при увеличении угла падения пучка. В ходе моделирования были получены данные о числе столкновений частиц с элементами шероховатости за один акт падения при ε=1, ε=0, *H*=1,3,5 и при θ_i =45° Установлено, что при диффузном рассеянии число многократных столкновений частиц с поверхностью увеличивается прямопропорционально средней высоте шероховатости в отличие от зеркального отражения, где высота неровности практически не оказывает влияние на число столкновений частиц при данном угле падения пучка на поверхность. Получено, что при полностью диффузном рассеянии (ε=1) доля частиц, испытывающих многократные столкновения с поверхностью, увеличивается с увеличением средней высоты шероховатости. Однако, доля пятикратных и более столкновений мала. При полностью зеркальном отражении (ε=0) число многократных столкновений возрастает с увеличением *H*.

При обработке данных численного эксперимента использовалась предложенная автором методика определения функции распределения компонент скорости отраженных частиц: на основе данных о скорости каждой частицы после взаимодействия с поверхностью определяется аналитический вид функции распределения компонент скорости отраженных частиц. Эту функцию можно представить комбинацией экспонент с соответствующими коэффициентами:

$$f(\upsilon_j) = \sum_{i=1}^{n} h_i \cdot \exp\left(\frac{-(\upsilon_j - a_i)^2}{2 \cdot \sigma_i^2}\right),\ j = x, y, z \qquad (1)$$

Выбор *n* определяет точность совпадения эмпирической формулы (1) с экспериментальными данными. Определив при помощи метода наименьших квадратов

параметры этой функции, становится возможным ее использование при задании граничных условий для газодинамического описания полей течения около поверхности, имеющей заданный уровень шероховатости.

На основании полученных данных можно заключить, что увеличение средней высоты шероховатости является одним из существенных факторов, оказывающих сопротивление потоку, особенно при зеркальном отражении молекул от поверхности. Данный факт следует учитывать при моделировании течений, внося при расчетах некоторые корректировки в вид функции распределения.

В ***третьей главе*** предложена методика моделирования шероховатых структур при помощи статистических методов и с использованием данных атомно-силовой микроскопии. Принцип статистического моделирования структур шероховатых поверхностей основывается на том, что благодаря анализу данных, получаемых при атомно-силовой микроскопии, становится возможным оценить реальную функцию распределения неровностей по высоте и получить аналитический вид этой функции. Моделирование шероховатости заключается в использовании статистических методов, которые применяются при разыгрывании высоты и ширины неровности согласно полученному закону распределения. Пример таких симуляций приведен на рис. 8-10. На рис. 8 приведена топограмма поверхности кристалла кремния, на рис. 9 – соответствующая функция распределения неровностей по высоте и на рис. 10 – смоделированная структура поверхности.

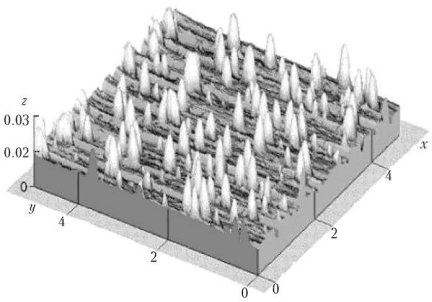


Рис. 8. Топограмма поверхности *Si* (область сканирования 5×5 мкм)

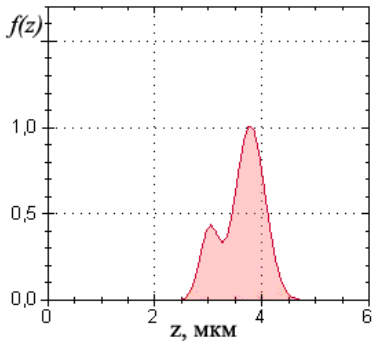


Рис. 9. Функция распределения неровностей по высоте образца, представленного на рис. 8

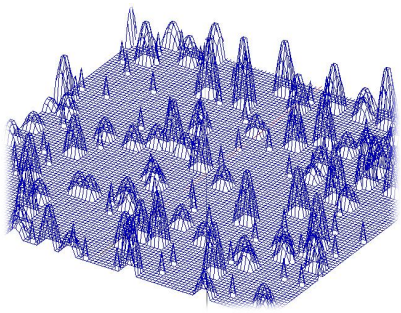


Рис. 10. Структура поверхности, смоделированная согласно представленной на рис. 9 функции распределения

Показано, что использование сплайна Акимы или кубического сплайна позволяет получать форму пиков, которая близка к форме, наблюдаемой при атомно-силовой микроскопии образцов. Следует отметить, что существенным недостатком кубического сплайна является его осциллирование в окрестностях точки, существенно отличающейся от соседних. На рис. 11 показаны кубический сплайн и сплайн Акимы, построенные при одних и тех же исходных данных.

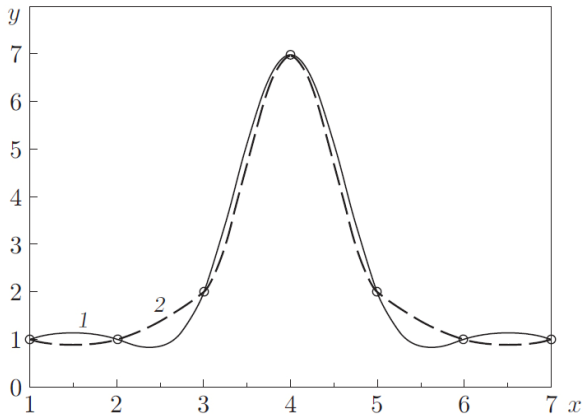


Рис. 11. Кубический сплайн (*1*) и сплайн Акимы (*2*), построенные при одних и тех же исходных данных (точки)

Видно, что в отличие от кубического сплайна сплайн Акимы менее подвержен влиянию выбросов. На отрезках, граничащих с точкой выброса, практически отсутствуют признаки осцилляции, что определило выбор сплайна при моделировании формы отдельных элементов шероховатой структуры.

Показано, что комбинируя полученные шероховатые поверхности согласно “правилам” (2) возможно получать довольно широкий спектр поверхностей.

$$z_{res} = \begin{cases} sum(z_1, z_2) \\ sub(z_1, z_2) \\ max(z_1, z_2) \\ min(z_1, z_2) \end{cases} \qquad (2)$$

При помощи разработанной методики, становится возможным построить поверхность, функция распределения неровностей по высоте которой будет практически совпадать с заданной функцией. Пример такого моделирования приведен на рис. 12, где представлена поверхность, являющаяся комбинацией шести «статистических» структур, причем функция распределения по высоте совпадает с изображенной на рис. 3.

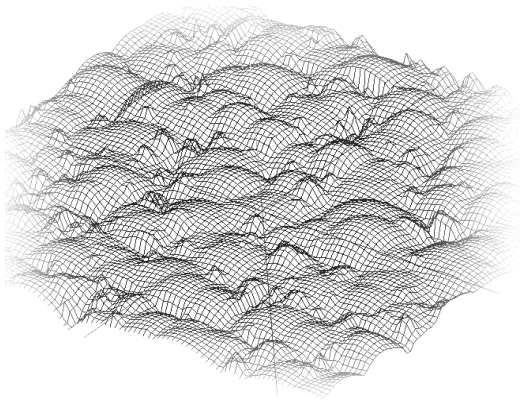
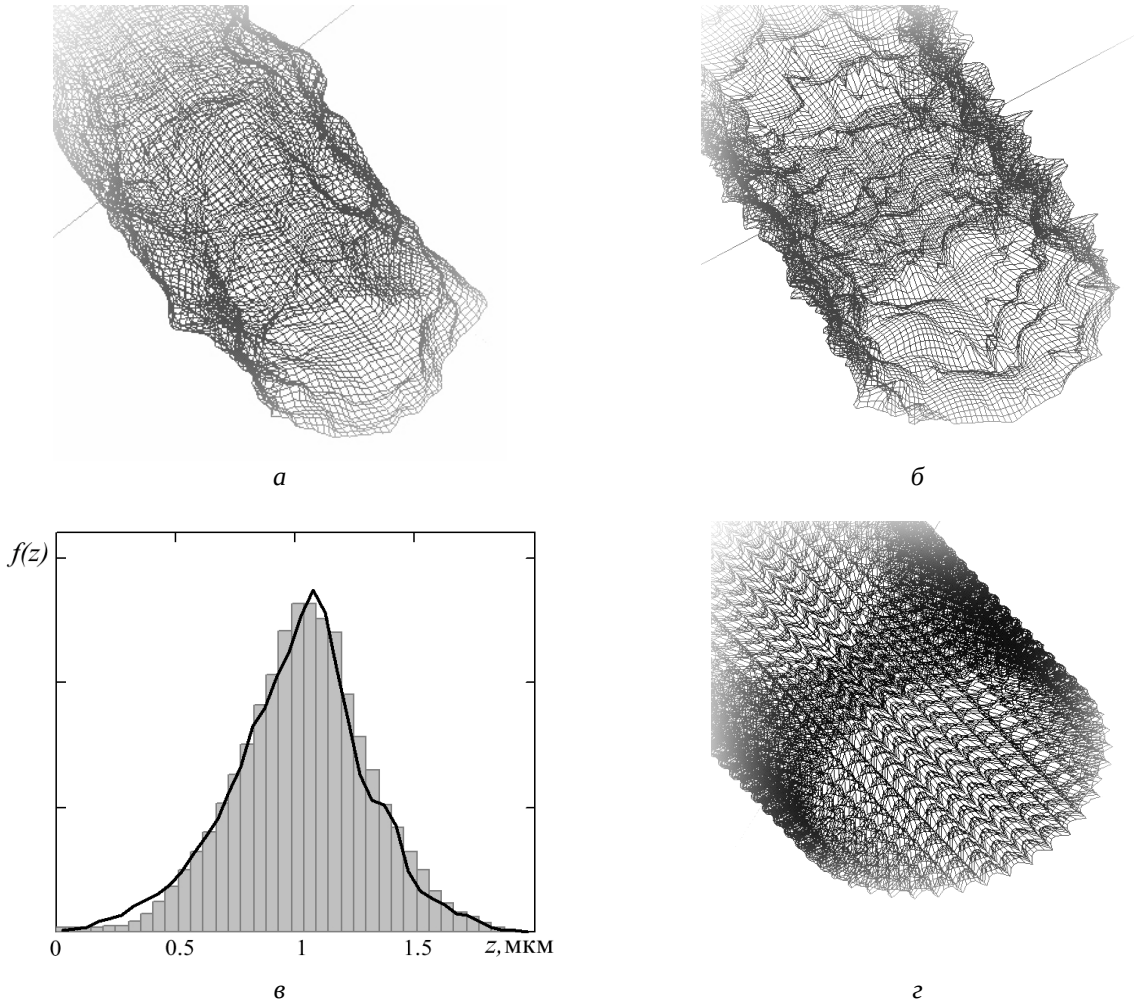


Рис. 12. Результат комбинирования шести «статистических» поверхностей

В ***четвертой главе*** представлены данные о влиянии структуры поверхности цилиндрических микроканалов на их вероятность прохождения *w*. Данные были получены при помощи разработанной методики моделирования структуры поверхности. Исследование выполнено при помощи метода пробных частиц, подробно описанного в [9]. Рассматривается полностью диффузное взаимодействие частиц с поверхностью, что соответствует ε =1.

Вероятность прохождения *w* была вычислена для цилиндрических каналов трех типов: 1 – канал (см. рис. 13*а*), структура которого восстановлена согласно данным атомно-силовой микроскопии на основе “реальной” (см. рис. 5а) поверхности; 2 – канал (см. рис. 13*б*), структура которого (см. рис. 12) получена совмещением шести «статистических» поверхностей, функция распределения микронеровностей по высоте которого близка к функции распределения шероховатости канала 1 (см. рис. 13*в*); 3 – канал (см. рис. 13*г*) с регулярной структурой поверхностной шероховатости (вырожденный случай), полученный равномерным распределением одинаковых пиков на поверхности канала. Все каналы имеют одинаковое значение средней высоты поверхностной микронеровности H_{ave} = 1.1 мкм.



а *б* *в* *г*

Рис. 13. *а* – канал, структура которого восстановлена согласно данным АСМ (см. рис 5*а*); *б* – канал построенный на основе “статистической” поверхности (см. рис. 12); *в* – распределение неровностей по высоте: сплошная линия соответствует “реальной” структуре, гистограмма соответствует “статистической” поверхности; *г* – Канал с регулярной структурой шероховатости

Вероятности прохождения *w*, полученные при различных отношениях длины канала *L* к его радиусу *R* для перечисленных выше каналов представлены совместно с данными Клаузинга [4] на рис. 14.

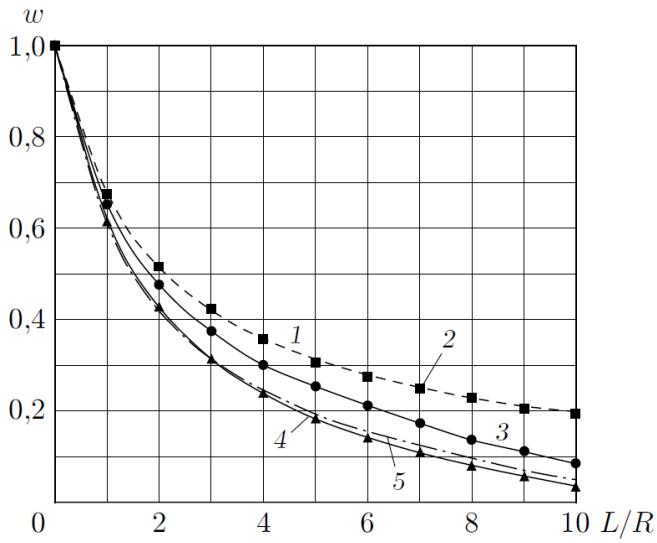


Рис. 14. Вероятность *w* прохождения цилиндрических каналов: *1* - данные Клаузинга [4]; *2* – “гладкая” структура; *3* – структура на основе данных АСМ; *4* – “статистическая” структура; *5* – “регулярная” структура

Таким образом, результаты численного моделирования потока разряженного газа в канале с учетом структуры его поверхности показывают, что шероховатость поверхности оказывает значительное влияние на газодинамическую проводимость канала на всем приведенном интервале значений *L*/*R*. Также показано, что средняя высота микронеровности поверхности и функция распределения элементов шероховатости по высоте не являются единственными факторами, которые влияют на вероятность прохождения молекул газа через цилиндрический канал. Кроме того, результаты, полученные для искусственных случаев (гладкая, “статистическая”, “вырожденная” структура канала), существенно отличаются от случая со структурой, восстановленной согласно данным АСМ. Это значит, что использование упрощенных моделей структур, которые используются во многих случаях, может привносить значительные погрешности при вычислении вероятности прохождения каналов.

Также были получены данные о вероятности прохождения *w* в зависимости от величины отношения радиуса *R* к среднему размеру шероховатости ⟨*Z*⟩ при постоянной длине *L* и радиусе канала. Моделирование выполнено для трех каналов *L*/*R* = 60, 90 и 120. Рассматривается полностью диффузное рассеяние на элементе поверхности (ε=1) . Изменение величины ⟨*Z*⟩ реализовано произведением координаты высоты каждой точки оцифрованного массива { z_i } и множителя *H* = 0 ÷ 1. Пример канала при *R*/<*Z*>=5 приведен на рис.15. Результаты моделирования вместе с данными Клаузинга [4] представлены на рис. 16.

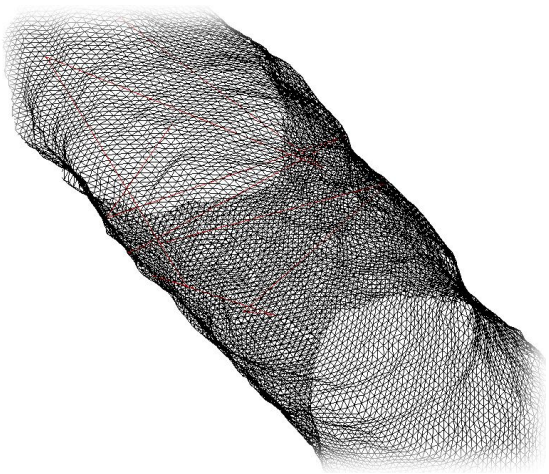


Рис. 15. Шероховатый канал, структура которого восстановлена согласно данным АСМ при *R*/<*Z*> = 5

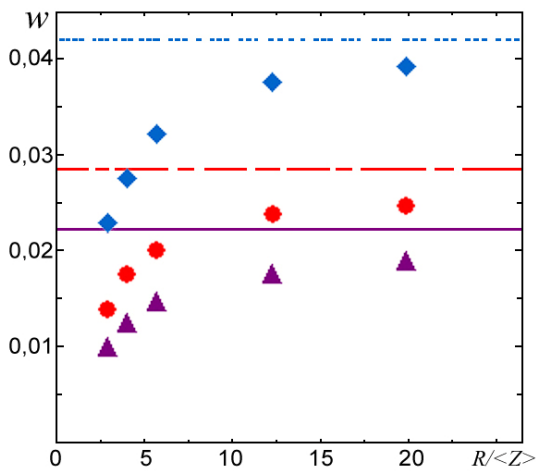


Рис. 16. Зависимость вероятности прохождения канала *w* от величины *R*/<*Z*>. ◆◆, ●●, ▲▲ - *L*/*R*=60, 90 и 120 соответственно; горизонтальными линиями отмечены данные Клаузинга [4] для абсолютно-гладких каналов

Таким образом, на основании полученных данных можно заключить, что при размерах средней высоты шероховатости на порядок меньшей, чем радиус канала

вероятность прохождения канала будет меньше примерно на 15-20% по сравнению с идеально-гладким каналом. Вдобавок к сказанному, эта разница будет увеличиваться при дальнейшем уменьшении величины *R*/<*Z*>.

В ***разделе 5.1*** описывается влияние химического состава поверхности на молекулярный теплообмен, в частности, приводятся данные о величине равновесного и неравновесного коэффициента аккомодации энергии, полученные при помощи разработанной автором компьютерной модели рассеяния атомов гелия на трехмерной кристаллической решетке вольфрама с учетом адсорбционного покрытия поверхности. Модель разработана на основе классических представлений о движении атомов и решеточной теории Ф. Гудмана и Г. Вахмана [7]. Иллюстрация рассеяния атома гелия на кристаллической решетке вольфрама, покрытой атомами кислорода, представлена на рис. 17. В разработанных алгоритме и программе создается модель газа и твердого тела, и рассматривается процесс энергообмена, который происходит в том случае, когда поверхность твердого тела полностью погружена в неподвижный газ. Особенность и целевая направленность разрабатываемого подхода заключаются в попытке приблизить процесс моделирования к условиям реального эксперимента по рассеянию атомов газа на контролируемой поверхности, выполненного ранее С.Ф. Борисовым [10]. Главная задача моделирования заключается в определении средней энергии, передаваемой или получаемой молекулами при столкновении их с приповерхностными атомами кристаллической решетки твердого тела. Результат взаимодействия выражается при помощи коэффициента аккомодации энергии (КАЭ), обозначаемого α и определяемого следующим образом

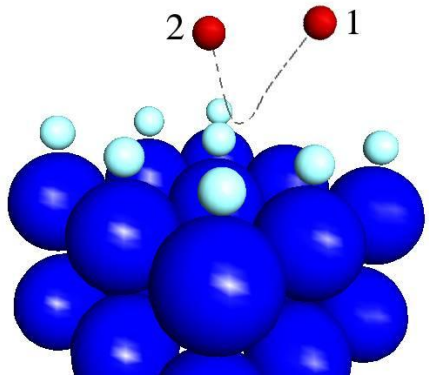


Рис. 17. Рассеяние атома *He* на кристаллической решетке *W* с адсорбированными атомами *O* при θ ~ 0.8: 1, 2 – начальное и конечное положение атома *He*

$$\alpha = \frac{E_i - E_r}{E_i - E_s}, \qquad (3)$$

где E_i - энергия, приносимая падающими молекулами, E_r - энергия, уносимая отраженными молекулами, E_s - энергия, которую уносили бы отраженные молекулы, если бы газ находился в тепловом равновесии с поверхностью. Модель рассеяния построена на основе следующих предположений: а) атомы газа и твердого тела представляют собой сферы, радиус и масса которых соответствуют характеристикам реальных атомов; б) кристалл *W* моделируется объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой, совершающей тепловые колебания при температуре T_s; в) силы взаимодействия между атомами кристалла моделируются только между ближайшими соседями; г) падающие на поверхность частицы газа представляют собой максвелловский поток при температуре T_g; д) сила взаимодействия между атомом *He* и твердым телом вычисляется с учетом всех атомов кристалла и адсорбированных на нем атомов; е) адсорбат моделируется атомами кислорода, поскольку их преимущественное присутствие на поверхности подтверждается данными электронно-спектроскопического анализа [11]; ж) рассматривается случай теплового рассеяния атомов на поверхности кристалла с энергиями $E_i < 0{,}1$ эВ, поскольку рассеяние частиц с более высокой энергией требует квантово-механического трактования; з) влияние всевозможных направлений осей кристалла на процесс рассеяния не рассматривается. Иными словами, атом газа взаимодействует с плоской поверхностью. Таким образом, получаемые в ходе моделирования данные представляют собой интегральное поведение системы газ–поверхность, которое реализуется в ходе всех возможных процессов рассеяния.

К основным особенностям разработанной Борисовым С.Ф. экспериментальной установки [10] по измерению коэффициентов аккомодации энергии (КАЭ) следует отнести технику очистки и диагностики поверхности, которая обеспечивала измерения при условиях, когда парциальное давление остаточных газов в исследуемом газе составляло менее 10^{-6} мм. рт. ст.. Установка включала в себя средства диагностики поверхности и газа. Она состояла из гелиевого крионасоса, масс-спектрометра и оже-спектрометра, заключенных в камеру с ультравысоким вакуумом вплоть до 10^{-10} мм. рт. ст. Состояние поверхности контролировалось с помощью оже-электронной спектроскопии *in situ* непосредственно в процессе измерения теплового потока [12, 13]. Так, например, ситуация, наблюдаемая в измеряемой системе во время процедуры очистки и измерения КАЭ для системы *He - W* представлена на рис. 18-20.

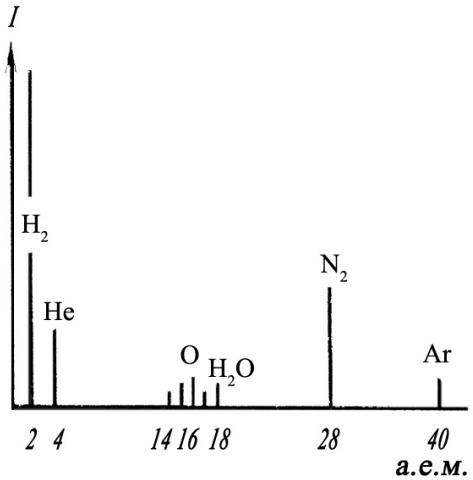


Рис. 18. Масс-спектр вакуумной камеры до напуска гелия в камеру, работа [10]

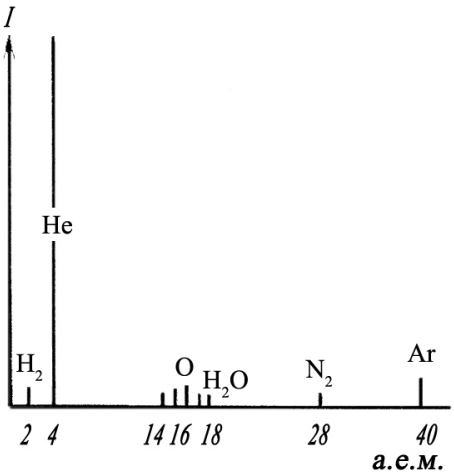


Рис. 19. Масс-спектр вакуумной камеры после напуска гелия в камеру, работа [10]

Согласно рис. 18 и 19 основными компонентами масс-спектра являются H_2, *He*, N_2, *Ar*, O_2 , а также кислород в соединении с углеродом CO_2 и водородом H_2O.

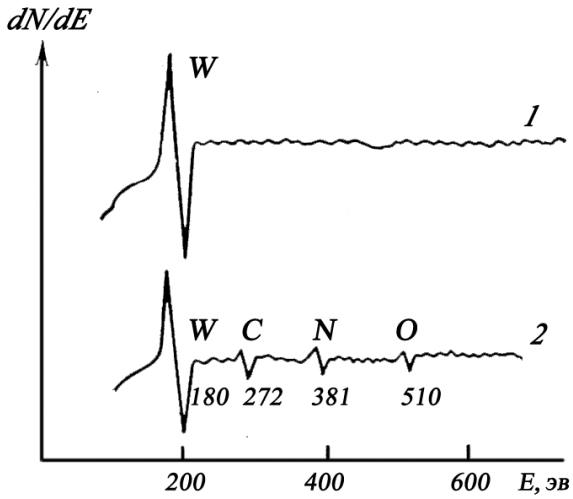


Рис. 20. Оже-спектры поверхности вольфрамовой нити, работа [10]:
1 –после термической очистки при 2700 К, *2* – частично покрытая *C, N, O* – комплексами поверхность

Интенсивность пиков, представленных на рис. 20, соответствует числу оже-электронов, которые определяют концентрацию соответствующих атомов на поверхности. Кроме того, данное соотношение убедительно показывает, что процедура очистки поверхности, реализованная в классической работе [14], является эффективной и действительно обеспечивает чистую поверхность вольфрама.

В разработанной модели используется предложенная автором функция распределения

теплового смещения атомов из положения равновесия. Известно [7], что для вольфрама при комнатной температуре среднеквадратичное смещение атома из равновесного положения $\sigma <$ 0.1Å. Принимая во внимание, что при росте T_s величина смещения атомов должна нелинейно увеличиваться, а при понижении T_s уменьшаться, экспериментально была подобрана зависимость $\sigma(T_S)$, описывающая изменение величины среднеквадратичного смещения атома кристалла в зависимости от температуры твердого тела:

$$\sigma(T_s) = -4\cdot10^{-10}T_s^{\,3} + 5\cdot10^{-7}T_s^{\,2} - 4\cdot10^{-5}T_s. \qquad (4)$$

График этой функции приведен на рис. 21.

В процессе моделирования в качестве адсорбата рассматривались атомы

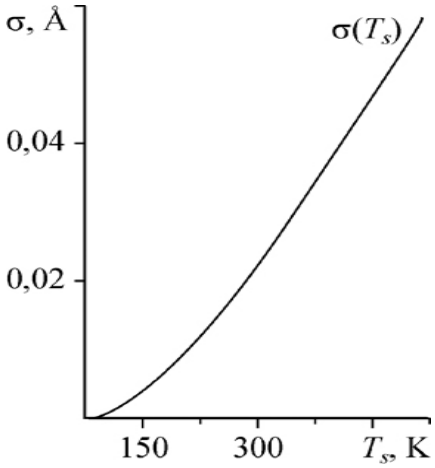


Рис. 21. Среднеквадратичное смещение σ (T_S) атома *W* из положения равновесия

кислорода, адсорбция которого на вольфраме возможна в двух конфигурациях: *W=O* и *W–O* с длиной связи примерно равной 2Å [15]. Поскольку цель создания идеальной конфигурации вольфрам–адсорбат не преследовалась, была выбрана пара *W=O*, атомы которой образуют двойную связь длиной b_0=2Å. Уравнение движения атома газа с массой M_g можно записать следующим образом:

$$\mathbf{R}(\tau) = \mathbf{R}(0) + \dot{\mathbf{R}}(0)\tau - (1/M_g)\sum_{\mathbf{M}}\int_0^{\tau} ds \int_0^{s} du\ \mathbf{F}_{gs,ga}(\mathbf{M},u). \qquad (5)$$

где $R(\tau)$ - положение атома газа в момент времени τ.

Уравнение движения **N**-го атома твердого тела с массой M_s имеет вид:

$$\mathbf{Y}(\mathbf{N},\tau) = \mathbf{Y}_t(\mathbf{N},\tau) + (1/M_s)\left[\sum_{\mathbf{M}}\int_0^{\tau} ds\int_0^{s} du\ \mathbf{F}_{ss,sa}(\mathbf{M},u) + \int_0^{\tau} ds\int_0^{s} du\ \mathbf{F}_{gs}(\mathbf{N},u)\right], \qquad (6)$$

Путем реализации описанной выше процедуры выполнено моделирование рассеяния атомов *He* на чистой поверхности *W* для равновесных условий, а также на частично покрытой адсорбатом (атомы кислорода) поверхности кристаллического *W* для равновесных и неравновесных условий рассеяния. Результаты моделирования рассеяния в равновесных условиях представлены на рис.22. В ходе отладки разработанной модели определена величина силовой постоянной k_W, которая характеризует силу, «стремящуюся» вернуть смещенный в ходе взаимодействия атом *W* в положение равновесия:

$$F_W(\Delta r) = -k_W \Delta r_W, \qquad (7)$$

где Δr_W – вектор смещения атома вольфрама из положения равновесия.

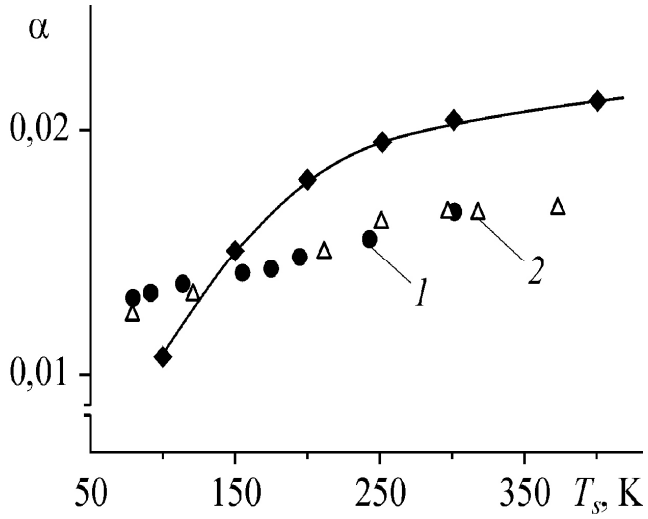


Рис. 22. Равновесная зависимость $\alpha(T_s)$ для *He* на чистой поверхности *W*, *1* — работа [14], *2* — работа [16]

Значение этой постоянной было получено в ходе нескольких итераций многократного моделирования рассеяния атома *He* на чистой поверхности *W*, при которых изменялось значение k_W, и вычислялся КАЭ. Выбор значения k_W определялся по принципу наилучшего совпадения полученного α с экспериментальными данными [14, 16].

На следующем этапе проводился ряд численных экспериментов по рассеянию атомов *He* на поверхности, покрытой адсорбатом (атомами *O*). В процессе моделирования каждой температуре поверхности T_s ставилось в соответствие новое значение силовой постоянной k_a связи *W*=O.

Величина k_a определялась из принципа наилучшего совпадения полученного КАЭ с экспериментом. В данном случае постоянная k_a характеризует силу взаимодействия между атомом адсорбата и соответствующим атомом поверхности. Сила взаимодействия может быть записана следующим образом:

$$F(\Delta b) = -k_a \Delta b = -k_a (b - b_0), \tag{8}$$

где b_0 - равновесное расстояние между атомом адсорбата и соответствующим атомом твердого тела, b - фактическое расстояние между атомами. В таблице 2 приведены данные для величины k_a в зависимости от T_s, а также значение k_W связи *W*–*W*.

Таблица 2. Значения силовых постоянных k_W и k_a для связи *W*–*W* и *W*=O при разных T_s и T_g

	(1/Å)	T_s (K)	T_g (K)
k_W *W*–*W*	500	150–450	150–450
k_a, *W*=O	30	298	300
	280	446	300

На рис. 23 представлены результаты работы [10], а также полученная зависимость неравновесного α от степени заполнения монослоя θ для двух температур поверхности T_s = 298 и 446 K и при температуре газа T_g = 300 K. Увеличение k_a с ростом температуры поверхности можно допустить, исходя из следующих соображений. В реальной ситуации с увеличением T_s колебательное движение адсорбированных атомов

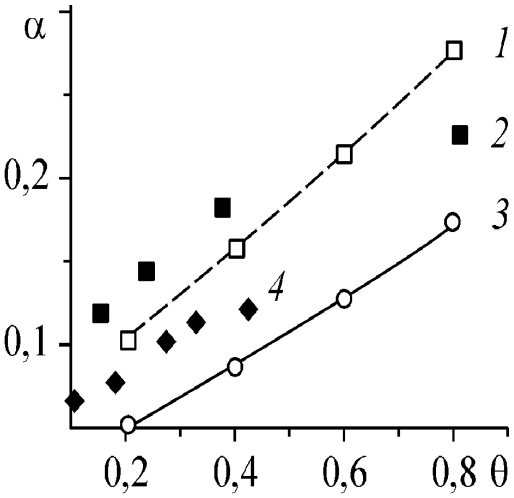


Рис. 23. Зависимость α от степени покрытия поверхности адсорбатом θ для системы *He–W* при T_g = 300 K. T_s = 298 (*1*, *2*), 446 (*3*, *4*) K, работа [10] (*2*, *4*)

становится более интенсивным, следовательно, вероятность того, что в процессе таких колебаний связь легкого атома с другими поверхностными атомами будет разорвана и атом десорбируется, становится больше. В первую очередь это относится к адсорбированному водороду и другим легким газам. При дальнейшем повышении T_s будет происходить десорбция молекул N_2, O_2, H_2O, комплекса C_mH_n, а также возможны реакции на поверхности с образованием CO, CO_2, H_2O. При повышении T_s уменьшается доля слабосвязанных адсорбированных атомов, что приводит к уменьшению “рыхлости” структуры, и атомы гелия уже сталкиваются с более жесткой структурой *W*=O, которая начинает разрушаться при температуре выше 2000 K.

Таким образом, главная причина температурной зависимости α для одних и тех же θ заключается в изменении характера энергообмена *He* с адсорбированными молекулами, что вызвано изменением структуры адсорбата.

В ***разделе 5.2*** приводятся результаты моделирования, описывающие влияние химического состава поверхности цилиндрического канала на течение разреженного газа. Цель предлагаемого подхода заключается в попытке описать реальный эксперимент [17] при помощи разработанной схемы взаимодействия атома газа с кристаллической структурой металла, которая описана в предыдущем разделе на примере взаимодействия гелия с вольфрамом. В частности, процесс моделирования основан на методе пробной частицы при условии, что каждый процесс столкновения частицы с поверхностью канала представляет собой рассеяние атома газа на трехмерной кристаллической решетке серебра, покрытой атомами кислорода в соответствии с заданной величиной заполнения монослоя. Пример траектории движения газовой частицы внутри цилиндрического канала показан на рис. 24. Взаимодействие атома *Ar* с адсорбатом представлено на рис. 25.

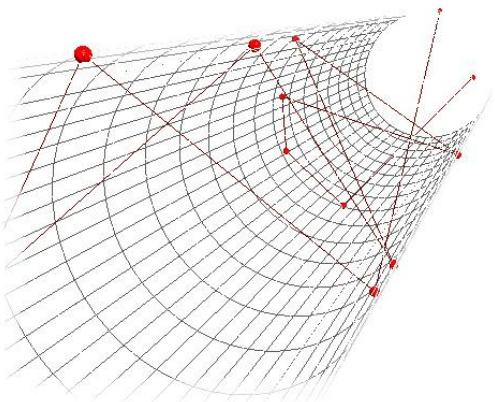


Рис. 24. Траектория движения газовой частицы внутри цилиндрического канала

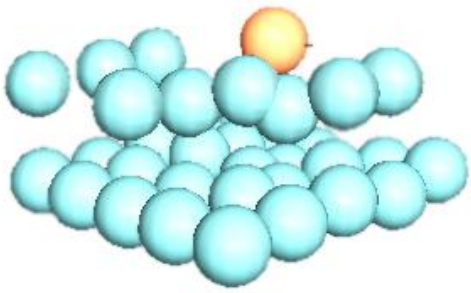


Рис. 25. Взаимодействие атома *Ar* с адсорбатом поверхности

В данной работе адсорбат был представлен в виде монослоя атомов кислорода. Силовая постоянная k_O , введенная по аналогии с k_W, определяет силу, действующую на смещенный из положения равновесия атом поверхности. Второй, физически адсорбированный и частично (θ=0.5) заполненный слой, состоит из соединений *H_20*, *CO*, *NO*.

Атомы этого уровня связаны с атомами нижнего слоя, состоящего из атомов кислорода, связью, характеризуемой силовой постоянной $k_{O\text{-}Ads}$, введенной по аналогии с постоянной k_a. Выбор значений силовых постоянных k_{Ag}, k_O, $k_{O\text{-}Ads}$ определялся наилучшим совпадением полученной проводимости с экспериментальными данными [17]. Полученные таким способом значения постоянных представлены в таблице 3.

Таблица 3. Значения силовых постоянных k_{Ag} , k_O и $k_{O\text{-}Ads}$ для пар взаимодействующих атомов *Ag–Ag*, *O-O* и *O-Ads*, соответственно

	(1/Å)	$T_s = T_g$ **(K)**
k_{Ag} , *Ag–Ag*	285	
k_O , *O-O*	10	300
$k_{O\text{-}Ads}$, *O-Ads*	1	

Результат моделирования и экспериментальные данные [17] выраженные в виде относительного потока газовых частиц внутри цилиндрического канала в зависимости от химического состава поверхности представлены в таблице 4.

Таблица 4. Величина относительного потока газовых частиц в зависимости от химического состава поверхности: *Ag* – чистая поверхность серебра, *(Ag)+O* – поверхность, полностью покрытая атомами кислорода

	He		***Ar***		***Kr***	
	работа [17]		работа [17]		работа [17]	
Ag	1.62	1.51	1.23	1.285	1.15	1.1
(Ag)+O	1.04	2.1	1.01	1.0	1.00	1.0

Основные результаты и выводы

1. Разработана методика, обеспечивающая моделирование поверхностной шероховатости с использованием статистических принципов, в том числе и построение шероховатой поверхности, функция распределения неровности по высоте которой практически совпадает с функцией распределения по высоте элементов шероховатости реальной поверхности, получаемой с использованием атомно-силовой микроскопии;
2. При помощи разработанной методики исследовано влияние средней высоты микроструктуры реконструированной на основе данных атомно-силовой микроскопии по рассеянию монохроматического молекулярного пучка при полностью зеркальном отражении и полностью диффузном рассеянии частиц на элементе поверхности. На основании полученных данных можно заключить, что увеличение средней высоты шероховатости является одним из существенных факторов, оказывающих сопротивление потоку особенно при зеркальном отражении молекул от поверхности. Продемонстрирована разработанная методика, позволяющая получать функцию распределения частиц, отраженных от шероховатой поверхности, и использовать ее в граничных условиях к задачам динамики разреженного газа;
3. Численным экспериментом подтверждены наблюдаемые экспериментально известные лепестковые индикатрисы рассеяния, форма которых зависит от угла падения монохроматического пучка частиц, средней высоты неровностей и доли диффузно-зеркального отражения частиц от элемента шероховатой с уменьшением средней высоты неровностей поверхности. Установлено, что при полностью зеркальном отражении частиц при любых углах падения пучка, форма индикатрис рассеяния близка к косинусоидальной.
4. Результаты численного моделирования потока разреженного газа в канале с учетом структуры его поверхности показывают, что шероховатость поверхности оказывает значительное влияние на газодинамическую проводимость даже для относительно коротких каналов. Показано, что средняя высота микронеровности поверхности и функция распределения элементов шероховатости по высоте не являются единственными

факторами, которые влияют на вероятность прохождения молекул газа через цилиндрический канал. Кроме того, результаты, полученные для искусственных случаев (гладкая, “статистическая”, “вырожденная” структура поверхности) существенно отличаются от случая со структурой, восстановленной согласно данным АСМ. Это означает, что использование упрощенных моделей структур, которые широко используются в практических приложениях, может привносить значительные погрешности при вычислении вероятности прохождения каналов.

5. При помощи метода пробной частицы изучено влияние величины относительной микрошероховатости структуры (восстановленной согласно данным атомно-силовой микроскопии) внутренней стенки цилиндрического канала на свободномолекулярное течение газа. Обнаружено, что при размерах средней высоты шероховатости, на порядок меньшей радиуса, вероятность прохождения меньше примерно на 15-20% по сравнению с идеально-гладким каналом. Эта разница увеличивается при дальнейшем уменьшении величины относительной шероховатости.
6. В работе продемонстрирована эффективность разработанной методики получения равновесных и неравновесных коэффициентов аккомодации энергии (КАЭ) атомов газа при рассеянии на поверхности кристаллической решетки. Сравнение расчетных зависимостей с данными, полученными в экспериментах с контролируемой поверхностью, показывает, что с помощью разработанного подхода достигнуто удовлетворительное описание экспериментальных температурных зависимостей равновесного КАЭ гелия для чистой поверхности вольфрама, а также неравновесного КАЭ для поверхности, частично заполненной адсорбатом (кислородом). Установлено, что главная причина температурной зависимости коэффициента аккомодации энергии при одной степени заполнения монослоя адсорбатом заключается в изменении характера энергообмена атома газа с адсорбированными молекулами, что, в свою очередь, вызвано изменением структуры самого адсорбата;
7. Впервые на основе разработанной автором модели, описывающей тепловую аккомодацию атомов газа на кристаллической структуре твердого тела, в совокупности с использованием метода пробных частиц, рассчитана вероятность прохождения цилиндрического канала (внутренняя стенка которого представляет собой напыление атомов серебра с адсорбированными атомами кислорода) атомами *He*, *Ar*, *Kr*. Полученные данные находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом.

Цитированная литература:

1. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф. Численное моделирование газодинамической проводимости микроканалов с учетом структуры поверхности // ПМТФ. 2009. Т. 50, № 5. с. 20-27.
2. Han Y.L., Muntz E.P., Shiflett G. Knudsen compressor performance at low pressure // Proc. of the 24th Inter. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, Monopoli (Bari), Italy, July 10-16, 2004, Amer. Inst. of Phys., Mellville, New York. 2005. Vol. 762. P. 162-167.
3. Knudsen M. The kinetic theory of gases. – London: Methuen, 1934; см. также Ann. Phys., 1910, B. 32, P. 809-842; 1911, B. 34, P. 593-656; 1930, B. 6, P. 129-185.
4. Clausing, P. The flow of highly rarefied gases through tubes of arbitrary length, //J. Ann. Phys., 1932. 12, P. 961–989.
5. Коленчиц О.А. Тепловая аккомодация системы газ–твердое тело. Минск: Наука и техника, 1977. 126 с.
6. Каминский М. Атомные и ионные столкновения на поверхности металлов. М.: Мир, 1967. 506 с.
7. F.O. Goodman and H.Y. Wachman. Dynamics of Gas-Surface Scattering. Academic Press, New York, 1976. P. 423.

8. Spanos L., Irene E.A. Roughened silicon surfaces using fractal analysis. //J. Vac. Sci. Technol. 1994. Vol. A 12 No. 5. P. 2646-2652.
9. Bird G. A., Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. N.Y.: Oxford University Press, 1994. P. 479.
10. Borisov S.F. A study of gas molecules energy and momentum accommodation on a controlled surface // Alfred E.Beylich Ed // Rarefied Gas Dynamics, Weincheim, New York, Basel, Cambridge: VCH, 1991. P. 1412-1418.
11. Борисов С.Ф., Балахонов Н.Ф., Губанов В.А. Взаимодействие газов с поверхностью твердых тел. М.: Наука, 1988. 200 с.
12. Борисов С.Ф., Шестаков А.М., Распопин А.С., Накаряков А.В., Суетин П.Е. Взаимодействие гелия с поликристаллической поверхностью вольфрама // Поверхность. 1985. Т. 6. с. 57-62.
13. Борисов С.Ф., Кочнев А.А., Кулев А.Н. Перенос энергии в неравновесной системе газ адсорбат–твердое тело // Докл. АН СССР. 1989. Т. 304, № 5. с. 1162-1165.
14. Thomas L.B. Thermal accommodation of gases on solids, Fundamentals of gas-furface interactions, N.Y., L.: Acad. Press, 1967. P. 346.
15. Lopez-Sancho J., De Segovia J. Adsorption kinetics and electron desorption of O_2 on polycrystalline tungsten // J. Surface Science, Vol. 30(2). 1972. P. 419-439.
16. Kouptsidis J., Menzel D. Berichte der Bunsen-Gesell // Phys. Chemie. f. 1970. Vol. B 74, P. 512-519.
17. O.V. Sazhin, S.F. Borisov, Surface Composition Influence on Internal Gas Flow at Large Knudsen Numbers // *Rarefied Gas Dynamics*, edited by T.J. Bartel and M.A. Gallis. Melville, N.Y., American Institute of Physics, 2001. pp. 911-915.

Основное содержание диссертации представлено в следующих публикациях:

Статьи, опубликованные в ведущих рецензируемых научных журналах, определенных ВАК:

1. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф.. Численное моделирование газодинамической проводимости микроканалов с учетом структуры поверхности // ПМТФ. 2009. Т. 50, № 5. С. 20-27.
2. Ухов А.И., Борисов С.Ф., Породнов Б.Т. Влияние адсорбционного покрытия поверхности на молекулярный теплообмен в системе разреженный газ–металл // Теплофизика и аэромеханика, 2010, Том 17, № 1 с. 141-150.
3. А.И. Ухов, С.Ф. Борисов, Б.Т. Породнов, Аккомодация энергии гелия на чистой и частично заполненной адсорбатом поверхности вольфрама // Перспективные материалы, 2010, №8 с. 42-48.

Другие публикации:

4. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Численное моделирование взаимодействия разреженного газа с поверхностью //Научные труды XIII отчетной конференции молодых ученых ГОУ ВПО УГТУ-УПИ: сборник статей. В 3 ч. Екатеринбург. УГТУ-УПИ, 2007 г., Ч. 3. с.176-179;
5. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Влияние микрошероховатости структуры на проводимость канала // Научные труды XIV отчетной конференции молодых ученых ГОУ ВПО УГТУ-УПИ. Сборник статей. Екатеринбург, 2008 г.;
6. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Модель рассеяния одноатомного газа на кристаллической структуре // Научные труды XV отчетной конференции молодых ученых ГОУ ВПО УГТУ-УПИ. сборник статей. В 3 ч. Екатеринбург: УГТУ-УПИ. 2009. Ч. 2. с. 276-277.
7. A. Ukhov, B. Porodnov and S. Borisov. Numerical simulation of gas dynamics conductivity of micro channels with consideration of surface structure //Rarefied gas dynamics: Proceedings of

the 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc., Melville, N.Y. 2009. Volume 1084, p. 712-717.
8. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф., Численное моделирование газодинамической проводимости микроканалов с учетом структуры поверхности, «Материалы VII – ой Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ'2008) » Алушта, Крым 24-31 мая 2008 г. – М.: Изд-во МАИ, 2008 г., с. 402-405;
9. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф. Моделирование рассеяния атомов гелия поверхностью кристаллического вольфрама // Материалы XVI Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2009). 25-31 мая 2009 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ: С.707-710.
10. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф., Численное моделирование шероховатых наноканалов и определение их проводимости // Сборник докладов XII – ой Международной научной конференции "Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул": Звенигород. 31 марта-4 апреля 2008 г., с. 162-167;
11. Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф., Численное моделирование газодинамической проводимости микроканалов с учетом структуры поверхности // I Всероссийская конференция ММПСН–2008 «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях», Москва, МИФИ 12–14 марта 2008 г., стр. 307-310;
12. A. Ukhov, S. Borisov, B. Porodnov, Surface structure effect on rarefied gas flow rate in microchannels //Proceedings of the 2nd international GASMEMS workshop (9-10 July 2010, Les Embiez, France), edited by A.J.H. Frijns;
13. A. Ukhov, S. Borisov, B. Porodnov, Surface Chemical Composition Effect on Internal Gas Flow and Molecular Heat Exchange in a Gas-Solids System //Rarefied gas dynamics: Proceedings of the 27th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics (принято в печать);